

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КОНОТОПСЬКИЙ ІНСТИТУТ

Кафедра електронних
приладів і автоматики

Кваліфікаційна робота бакалавра
**ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ТЕМПЕРАТУРИ НА
ПАРАМЕТРИ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ КРЕМНІЄВИХ
НАНОДРОТІВ**

Студентка гр. ЕІ₃-81_к

Фаткулліна І.В.

Науковий керівник,
к.ф.-м.н., доцент

Бурик І.П.

Конотоп 2022

РЕФЕРАТ

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі кремнієвих нанодротів.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних моделей сонячних елементів на основі кремнієвих нанодротів, алгоритмів їх комп'ютерного моделювання, аналізу отриманих експериментальних результатів.

При виконанні роботи для розробки та створення структур сонячних елементів на основі кремнієвих нанодротів використовувалися методи комп'ютерного приладно-технологічного моделювання у програмному середовищі Silvaco TCAD.

У результаті проведених досліджень було виконано ряд моделювань структур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто навичок роботи з транспортними моделями, зроблено висновки про особливості застосування таких елементів в сучасній мікроелектроніці.

Робота складається із вступу, трьох розділів основної частини та висновків, У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, особливостей будови кремнієвих фотогальванічних елементів. У другому розділі описано методи отримання кремнієвих структур, розробку та опис програми для моделі фотоелектричного перетворювача сонячної енергії на основі кремнієвих нанодротів. У третьому розділі аргументовано вибір транспортних моделей для р-і-п наноструктур, проаналізовано та порівняно результати моделювання з реальними характеристиками.

Робота викладена на 36 сторінках, у тому числі включає 9 рисунків, список цитованої літератури із 28 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: СОНЯЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ, КРЕМНІЄВИЙ НАНОДРОТ, РОБОЧІ ПАРАМЕТРИ, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

ЗМІСТ

	Стор.
ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ПРИНЦИПУ ДІЇ ТА БУДОВА КРЕМНІЄВИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ	5
1.1. Фотогальванічні властивості р-п переходу.....	5
1.2. Особливості будови сучасних сонячних батарей.....	10
1.2.1. Фотоелементи з р-і-п структурою.....	12
1.2.2. Нанодротові сонячні елементи.....	14
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	17
2.1. Методи отримання кремнієвих структур.....	17
2.2. Чисельне моделювання нанодротових сонячних елементів.....	20
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	24
3.1. Транспортні моделі.....	24
3.2. Геометрія аксіальної р-і-п структури	27
3.3. Температурні залежності.....	29
ВИСНОВКИ	32
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	33
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ РОБОТИ	36

ВСТУП

Перспективним напрямом подальшого розвитку фотовольтаїки вважається застосування фотоелектричних перетворювачів (ФЕП) сонячної енергії з нанодротовими елементами. Разом з цим значний інтерес до нанодротів Si, InP, GaAs, InGaN та ін. як елементів для створення високоефективних фотоперетворювачів сформував новий напрям нанодротової фотовольтаїки [1-23]. Найбільш актуальними є дослідження їх структурних, оптичних, електричних, температурних та інших характеристик напівпровідникових нанодротів. У цій роботі представлено результати числового моделювання аксіальних p-i-n структур сонячних елементів на основі нанодротів Si. Геометрія 3D структур, світлові (AM1.5G, 1 sun) та темнові вольт-амперні характеристики проектувалися за допомогою інструментів Silvaco TCAD. В рамках дрейф-дифузійної моделі транспорту з статистикою Фермі-Дірака продемонстровано відмінні характеристики, зокрема було отримано допустимі значення електричних параметрів: напруги холостого ходу U_{OC} , густини сили струму короткого замикання J_{SC} , максимальної потужності P_m , форм фактора FF and фотовольтаїчної ефективності η [24-26] та інших. Досліджено вплив температури на вольт-амперні характеристики та електричні параметри. В інтервалі температур від 300 К до 400 К визначено температурні коефіцієнти напруги холостого ходу, густини сили струму короткого замикання, форма фактора та ефективності для коаксіальних нандротових сонячних елементів на основі Si. Отримані результати чисельного моделювання мали добре узгодження з експериментальними даними та можуть бути застосовані для подальшого дослідження нанодротових ФЕП.

РОЗДІЛ 1 ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ПРИНЦИПУ ДІЇ ТА БУДОВА КРЕМНІЄВИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. Фотогальванічні властивості p-n переходу

Фотоелектричний ефект (пряме перетворення сонячної енергії на електричну за рахунок передачі енергії фотонів безпосередньо електронам) виникає в напівпровідникових структурах за наявності в них енергетичного бар'єру. Останній являє собою вбудоване електричне поле, що виникає між двома напівпровідниковими матеріалами, що відрізняються типами провідності. Розглянемо процеси, що відбуваються в p-n переході та поблизу нього при висвітленні монохроматичним випромінюванням. Нехай p-n перехід розташований поблизу освітлюваної поверхні напівпровідника. Виберемо таку енергію квантів випромінювання, щоб фотони поглиналися в напівпровіднику, причому електронно-діркові пари виникали б лише у p-області з відривом менше дифузійної довжини електронів від p-n переходу.

При використанні освітленого p-n переходу як джерела електроенергії до його контактів має бути приєднаний опір навантаження R_n . Розглянемо два випадки: $R_n = 0$ (режим короткого замикання) і $R_n = \infty$ (режим холостого ходу). Зонні діаграми p-n переходу цих режимах зображені відповідно на рис.1.1 а,б. У першому випадку зонна діаграма освітленого p-n переходу не відрізняється від зонної діаграми при термодинамічній рівновазі (тобто без освітлення і без прикладеної напруги зміщення), оскільки зовнішнє закорочення забезпечує нульову різницю потенціалів між n- та p-областями. Однак через p-n перехід та зовнішній напівпровідник тече струм, зумовлений фотогенерацією електронно-діркових пар у p-області. Фотоелектрони, що утворилися в безпосередній близькості до області об'ємного заряду, захоплюються електричним полем p-n переходу та потрапляють у n-область. Інші фотоелектрони дифундують до p-n переходу, намагаючись заповнити їх спад, і зрештою також потрапляють у n-область. У n-області виникає спрямований рух електронів до тильного металевого контакту, перетікання у

зовнішній ланцюг та контакт до р-області. На межі контакту до р-області відбувається рекомбінація електронів, що підійшли сюди, з фотогенерованими дірками.

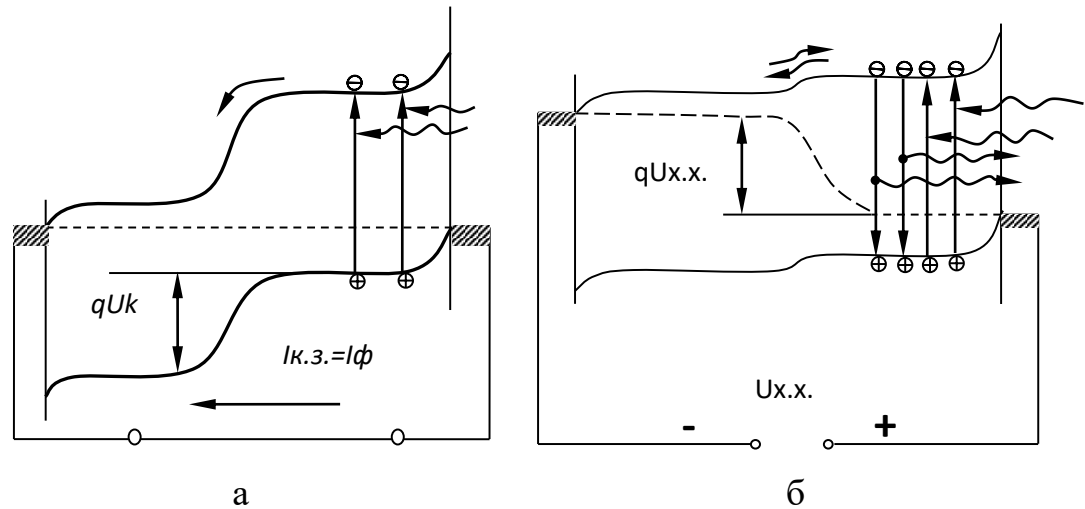


Рис. 1.1. Зонна енергетична діаграма р-п переходу при освітленні в режимі короткого замикання (а) та холостого ходу (б) [24]

Звернемо увагу на енергетичні діаграми n- та р-областей поблизу контактів. Вони відповідають ідеальним контактам, що не випрямляють (тобто омичним), між металом і напівпровідником, коли енергетичний бар'єр для протікання носіїв відсутній. Це досягається більш сильним легуванням n- та р-областей поблизу контактів, з тим, щоб $E_c - E_f$ і $E_f - E_v$ були рівними нулю, а також підбором металів (різних для контакту до n- і р-області), що мають рівень Фермі на тій самій висоті, що й у напівпровіднику.

При розімкнутого зовнішнього ланцюга рп-переходу (рис.1.1б) фотоелектрони потрапляючи в n-область, накопичуються в ній заряджають n-область негативно. Надлишкові дірки, що залишаються в р-області, заряджають р-область позитивно. Різниця потенціалів, що виникає таким чином, є напругою холостого ходу U_{xx} . Полярність U_{xx} відповідає прямому зсуву р-п переходу.

Величина U_{xx} завжди менша за контактну різницю потенціалів U_k , що означає, що в діаграмі р-п переходу завжди зберігається «сходінка» ΔE_c .

Потенційна енергія електронів, що знаходиться біля дна зони провідності, у n-області менше, ніж у p-області. Це є причиною ефективного витягування фотоелектронів з p-області n-область. Таким чином, потік фотоелектронів не залежатиме від напруги усунення pn-переходу (як позитивного, так і негативного аж до напруги, при якому починається лавинне множення носіїв струму). Потік генерованих світлом носіїв утворює фотострум I_{ϕ} . Тут передбачається, що у напівпровіднику кожен поглинений фотон з енергією $h\nu \geq E_g$ створює одну електронно-діркову пару. Ця умова зазвичай добре виконується для сонячних елементів на основі Si.

При нульових внутрішніх омичних втратах у сонячних елементах режим короткого замикання (рис.1.1а) еквівалентний нульовій напрузі зміщення pn-переходу, тому струм короткого замикання $I_{кз}$ дорівнює фотоструму $I_{кз} = I_{\phi}$. У режимі холостого ходу (рис.1.1б) фотострум врівноважується «темновим» струмом I_m - прямим струмом через p-n перехід, що виникає при напрузі зміщення величиною $U_{хх}$.

Темновий струм супроводжується рекомбінацією неосновних носіїв струму (у разі – електронів в p-області). При актах рекомбінації потенційна енергія електронно-діркових пар виділяється або за допомогою випромінювання фотонів з $h\nu \approx E_g$, або витрачається на нагрівання кристалічних ґрат. Обидва ці процеси схематично показані додатковими стрілками на рис.1.1б. Таким чином, режим холостого ходу сонячних елементів еквівалентний режиму роботи світлодіодів [25], а також випрямних діодів у пропускну напрямку.

Зонна діаграма p-n переходу в режимі увімкнення навантаження зображена на рис.1.2а. У міру збільшення опору навантаження R_n струм через нього зменшується, так як зі збільшенням прямого зміщення p-n перехід шунтує навантаження.

Освітлений p-n перехід може бути представлений у вигляді еквівалентної схеми рис.1.2б. При розгляданні ідеального ФЕП використовується еквівалентна схема заміщення. ФЕП представляється у

вигляді діода, тому що він являє собою гомо або гетеро перехід, та джерела струму. Джерело струму моделює струм створений у ФЕП під дією сонячного випромінювання. При варіюванні R_H фотострум перерозподіляється між навантаженням і рп-переходом.

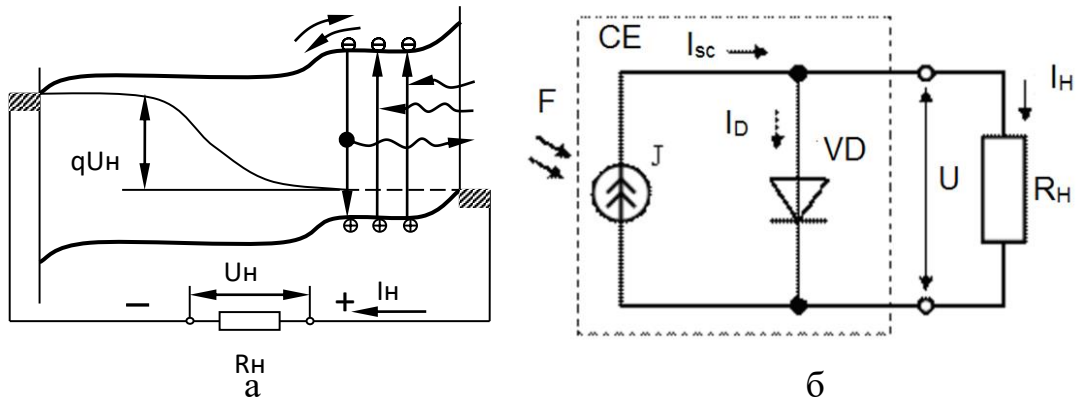


Рис. 1.2. Зонна енергетична діаграма (а) та еквівалентна схема (б) р-п переходу при освітленні в режимі включення на опір навантаження [24]

У режимах короткого замикання і холостого ходу електрична потужність, що виділяється в навантаженні, $P=0$, оскільки U_H або I_H рівні нулю. Очевидно, існує деяке оптимальне значення $R_H=R_{opt}$, своє для кожного рівня освітленості, при якому P досягає максимального значення P_{max} , безпосередньо пов'язане з максимальною корисною енергією E_{max} . Коефіцієнт корисної дії (ККД) р-п переходу як фотоелектричного перетворювача монохроматичного випромінювання може бути визначений як ставлення корисної енергії E_{max} до енергії одного поглиненого фотона $h\nu$.

Основні енергетичні показники ФЕП зумовлені: відбиттям сонячного випромінювання від віконного шару; проходженням фотонів поглинаючого шару без безпосереднього поглинання приладом; опорами приладу (внутрішній, контактний); рекомбінацією генерованих носіїв заряду (міжфазна, об'ємна); змінами інтенсивності сонячного випромінювання та температури.

Вже в перших роботах, присвячених теорії та експериментальному вивченню властивостей сонячних елементів, було показано, що вольт-

амперна характеристика сонячного елемента відрізняється від вольт-амперної характеристики напівпровідникового діода появою члена I_ϕ , що позначає струм, що генерується елементом під дією освітлення, частина якого I_ϕ тече через діод, інша частина I - через зовнішнє навантаження ($I_\phi = I_\phi + I$, де $I_\phi = I_0(\exp(qU/kT) - 1)$ - звичайна темнова характеристика, у якій I_0 - зворотний струм насичення р-п переходу q - заряд електрона; T - абсолютна температура; k - постійна Больцмана; U - напруга.

$$U_{x.x} = \ln(I_\phi/I_0 + 1)kT/q \quad (1.1)$$

Для реального сонячного елемента характерна наявність послідовного опору R_p , який складається з послідовно включених опорів кожної з р- та п-областей елемента, перехідних опорів метал-напівпровідник, а також шунтуючого опору $R_{ш}$, що відображає можливі поверхневі та об'ємні витоки струму по опору, паралельному рп-переходу. Облік цих супровідтивлений і рекомбінації в р-п переході призводить до розгорнутого виразу для вольтамперної характеристики, яке введений коефіцієнт A :

$$\ln\left(\frac{I+I_\phi}{I_0} - \frac{U-IR_p}{I_0R_{ш}} + 1\right) = \frac{q}{AKT}(U - IR_p). \quad (1.2)$$

Рівняння (1.2) можна записати у зручнішому для практичного використання вигляді:

$$I = I_\phi - I_0 \left(\exp \frac{q(U+IR_p)}{AKT} - 1 \right) - \frac{U+IR_p}{R_{ш}}. \quad (1.3)$$

Вихідна потужність P , що знімається з 1 см^2 сонячного елемента, може бути оцінена зі співвідношень $P = (InUn)_{max} = \xi I_k \cdot 3 U_{x.x}$, де величина ξ , звана коефіцієнтом заповнення вольт-амперної характеристики, показує ступінь наближення форми вольт-амперної характеристики до прямокутної:

$\xi \cong 0,8 \div 0,9$ означає отримання елементів із високою вихідною потужністю. У сучасних кремнієвих сонячних елементів коефіцієнт ξ зазвичай становить 0,75-0,8.

1.2. Особливості будови сучасних сонячних батарей

Залежно від того, як організовані атоми кремнію в кристалі, сонячні елементи (СЕ) поділяються на види (рис. 1.3):

- сонячні елементи із монокристалічного кремнію;
- сонячні елементи із полікристалічного кремнію;
- сонячні елементи з аморфного кремнію

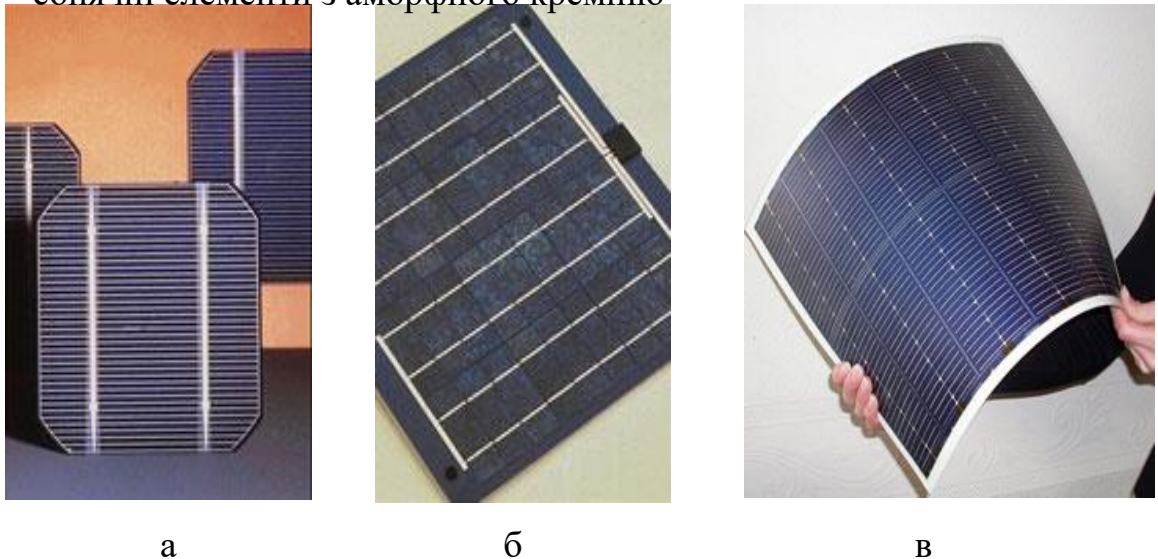


Рис. 1.3. Види сонячних елементів на основі монокристалічного (а), полікристалічного (б) та аморфного (в) кремнію [25]

ККД сонячної панелі на основі монокристалічного кремнію становить 14-17%. Монокристалічні елементи мають найвищу ефективність перетворення енергії. Основний матеріал - дуже чистий кремній, з якого виготовлені монокристалічні сонячні панелі (рис.1.3а), добре освоєний в галузі виробництва напівпровідників.

ККД сонячної панелі з урахуванням полікристалічного кремнію (рис.1.3б) становить 10-12%. Полікристалічний кремній розвивається, коли

кремнієвий розплав охолоджується повільно та перебуває під контролем. Однак усередині кристала полікристалічного кремнію є області, відокремлені зернистими межами, що викликають меншу ефективність елементів.

ККД сонячної панелі на основі аморфного кремнію (рис.1.3в) становить 5-6%. Аморфний кремній виходить за допомогою «техніки випарної фази», коли тонка плівка кремнію осаджується на підкладку і захищається покриттям.

Перші надійні та довговічні ФЕП сонячної енергії були виготовлені на основі монокристалічного кремнію для електропостачання космічних апаратів [28]. Для більшості споживачів для роботи значні струм і напруга, тому одиничні ФЕП збираються паралельно/послідовно в сонячні модулі необхідної потужності та вихідної напруги. Вартість таких модулів визначається вартістю пластин монокристалічного кремнію із товщиною (300-500мкм). Такі пластини отримують шляхом розрізання вирощеного при температурі 1000 °С циліндра діаметром 150 мм. При різанні на пластини майже половина матеріалу йде у стружку.

Комерційно привабливими стають СЕ на основі полікристалічної кремнієвої стрічки. ККД нижче ніж у монокристалічних, але вони виробляють електроенергії більше, ніж було витрачено на їх виробництво.

Аморфний (а) кремній виступив як дешевша альтернатива монокристалічного [4]. Перші СЕ з його основі було створено 1975 року. Оптичне поглинання аморфного кремнію в 20 разів вище кристалічного. Тому для суттєвого поглинання видимого світла достатньо плівки а-Si:H завтовшки 0,5-1,0 мкм замість дорогих кремнієвих 300-мкм підкладок. Крім того, завдяки існуючим технологіям отримання тонких плівок аморфного кремнію великої площі не потрібно операції різання, шліфування та полірування, необхідних для СЕ на основі монокристалічного кремнію. Порівняно з полікристалічними кремнієвими елементами виробу на основі а-Si:H виробляють за нижчих температур (300°C): можна використовувати дешеві скляні підкладки, що скоротить витрату кремнію в 20 разів.

Поки що максимальний ККД експериментальних елементів на основі а-Si:H – 12% - дещо нижчий за ККД кристалічних кремнієвих СЕ (~15%). Однак не виключено, що з розвитком технології ККД елементів на основі а-Si:H досягне теоретичної межі – 16 %.

1.2.1. Фотоелементи з р-і-п структурою

Високу ефективністю мають ФЕП на основі аморфного кремнію з р-і-п структурою. Це завдання вирішується, якщо під час виготовлення р-і-п структури першим формувати р-шар (рис.1.4а). Для його створення потрібна невелика кількість бору ($<10^{18}$ см⁻³), а значить, суттєвого забруднення нелегованого шару не відбувається. У той же час, якщо першим брати в облогу n-шар, то наявність залишкового фосфору змінює властивості і-шару.

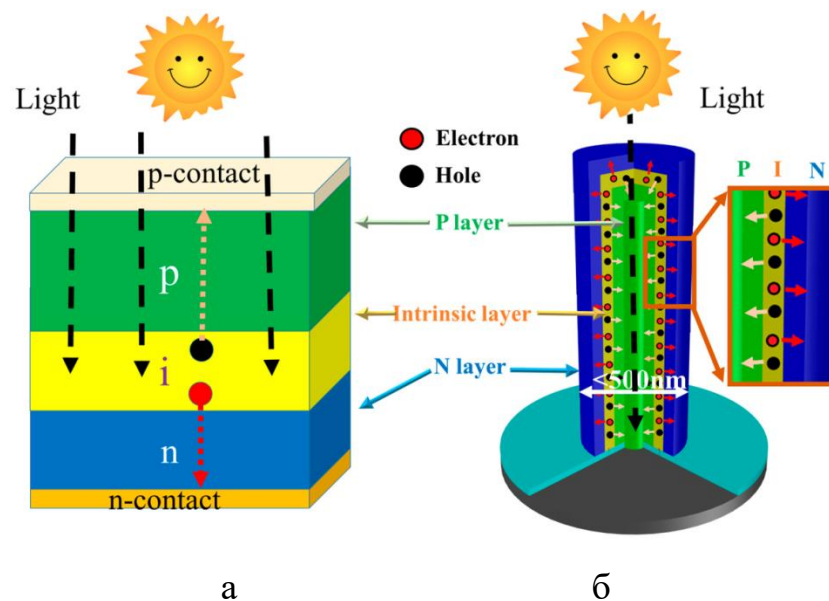


Рис.1.4. Ілюстрація шляху поширення фотона та носіїв у тонкоплівкових (а) і нанодотових (б) сонячних елементах [1]

Формування р-шару на поверхні прозорого провідного електрода забезпечує електричний контакт. Однак товщина р-шару повинна бути мала (10 нм), щоб основна частина світла поглиналася в і-області.

Проблема із застосуванням розглянутих р-і-n елементів у тому, що їх можна оптимізувати лише в одному вимірі. Значно більше можливостей у цьому плані надає ФЕП з поперечним переходом [27]: на ізолюючій підкладці перпендикулярно поверхні формується р-і-n структура. Такий елемент не вимагає прозорого провідного оксиду як контакту і широкозонного р-шару для створення прозорого віконного шару, його можна виготовити за допомогою стандартних технологій мікроелектроніки.

Як приклад на рис.1.4б наведено р-і-n нанодротова структура ФЕП. Він поглинає світло вздовж усього нанодроту, в той час як генеровані носії можуть бути ефективно розділені в радіальному напрямку. Радіальна відстань для носіїв (в діапазоні сотень нм) зазвичай набагато менша або порівнянна з довжиною дифузії носіїв. Таким чином, ортогональне розділення напрямів поглинання світла і руху носіїв можуть призвести до низької масової рекомбінації, а отже, і до високої ефективності. Крім того, нанодротові ФЕП мають велике відношення поверхні до об'єму, що забезпечує велику площу покриття (до 10^3 разів більше, ніж у тонких плівках), що може додатково підвищити ефективність поділу заряду.

Більшість сучасних СЕ мають один р-n перехід. У такому елементі вільні носії заряду створюються лише тими фотонами, енергія яких більша або дорівнює ширині забороненої зони. Іншими словами, фотоелектричний відгук одноперехідного елемента обмежений частиною сонячного спектра, енергія якого вища за ширину забороненої зони, а фотони меншої енергії не використовуються. Подолати це обмеження дозволяють багат шарові структури з двох і більше СЕ з різною шириною забороненої зони. Такі елементи називаються багатоперехідними, каскадними чи тандемними [25]. Оскільки вони працюють із значно більшою частиною сонячного спектра, ефективність фотоелектричного перетворення у них вища.

У типовому багатоперехідному сонячному елементі (рис.1.5) одиночні фотоелементи розташовані один за одним таким чином, що сонячне світло спочатку потрапляє на елемент із найбільшою шириною забороненої зони,

при цьому поглинаються фотони з найбільшою енергією. Пропущені верхнім шаром фотони проникають у наступний елемент із меншою шириною забороненої зони тощо.

Основний напрямок досліджень у галузі каскадних елементів пов'язаний з використанням арсеніду галію як один або кілька компонентів. Ефективність перетворення подібних ФЕП досягає 35%. Крім того, в каскадних елементах широко застосовуються аморфний кремній, сплави на його основі ($a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{:H}$, $a\text{-Si}_{1-x}\text{Ge}_x\text{:H}$), а також CuInSe_2 .

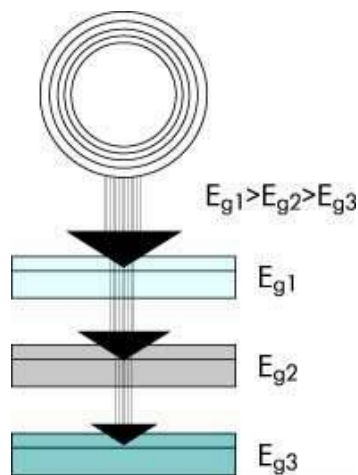


Рис. 1.5. Принцип побудови багатоперехідного сонячного елемента [27]

Дуже перспективні каскадні батареї, які з трьох елементів із різною шириною забороненої зони [27]. Верхній шар, що поглинає короткохвильову область сонячного спектру, сформований із сплаву на основі $a\text{-Si:H}$ із шириною оптичної щілини 1,8 еВ.

Для середнього елемента як шар і-типу використаний сплав $a\text{-SiGe:H}$ із вмістом германію $\sim 10\text{-}15\%$. Ширина оптичної щілини даного шару (1,6 еВ) ідеальна для поглинання зеленої області сонячного спектра. Нижня частина СЕ поглинає довгохвильову частину спектра, при цьому використовується і-шар $a\text{-SiGe:H}$ з концентрацією германію 40-50%. Непоглинене світло відбивається від заднього контакту на основі Ag/ZnO . Усі три елементи

каскадної сонячної батареї пов'язані між собою сильнолегованими шарами, що утворюють тунельні переходи між сусідніми елементами.

1.2.2. Нанодротові сонячні елементи

Перевагами нанодротових фотоелектричних перетворювачів порівняно з іншими фотогальванічними структурами еквівалентного об'єму (плівковими, планарними, порошковими матеріали) є можливість інтеграції високоякісних недорогих матеріалів з відмінними оптоелектричними властивостями, кращі деякі електричні параметри, тощо. Слід відміти, що на даний момент одиночні нанодротові сонячні елементи досягли ефективності 10.2 % для горизонтальних структур і 40.0 % для вертикальних структур [1]. Такі досягнення неодмінно сприяють розробці нових високоефективних та дешевих нанодротових фотоелектричних перетворювачів [1-3], зокрема таких як тандемні або аксіально тандемні, розгалужені, неорганічні/органічні гібридні, на гнучких підкладках та підкладках із скла, аморфного кремнію, графену, вуглецевих нанотрубок, тощо.

Постійний пошук вдосконалення методів збору сонячної енергії та збільшення ефективності фотоелектричних перетворювачів обумовлює значний інтерес до коаксіальних р-і-п структур на основі нанодротів, насамперед до їх структурних, оптоелектричних, температурних та інших характеристик [1-11]. Нанодротові масиви мають оптимальне захоплення широкої частини сонячного спектру, що забезпечує ефективне збирання сонячної енергії, меншу дифузійну довжину пробігу зарядів, тощо. Для виготовлення нанодротових сонячних елементів найбільш широко застосовують Si [1-7], InP [1,9], GaAs [1], AlAs–GaAs [10] та ін.

Як приклад на рис.1.6 приведено структури та темнові та світлові вольт-амперні характеристик (ВАХ) сонячних елементів у вигляді нанодроту GaAs (рис.1.6 а) та GaAsP (рис.1.6 б) або нанодротових систем GaAs (рис.1.6в) та InP (рис.1.6 г), виміряні при сонячному освітленні (AM1,5G) [1]. Отримано

збільшення фотовольтаїчної ефективності для нанодотових систем у порівнянні із структурами на основі одного нанодоту.

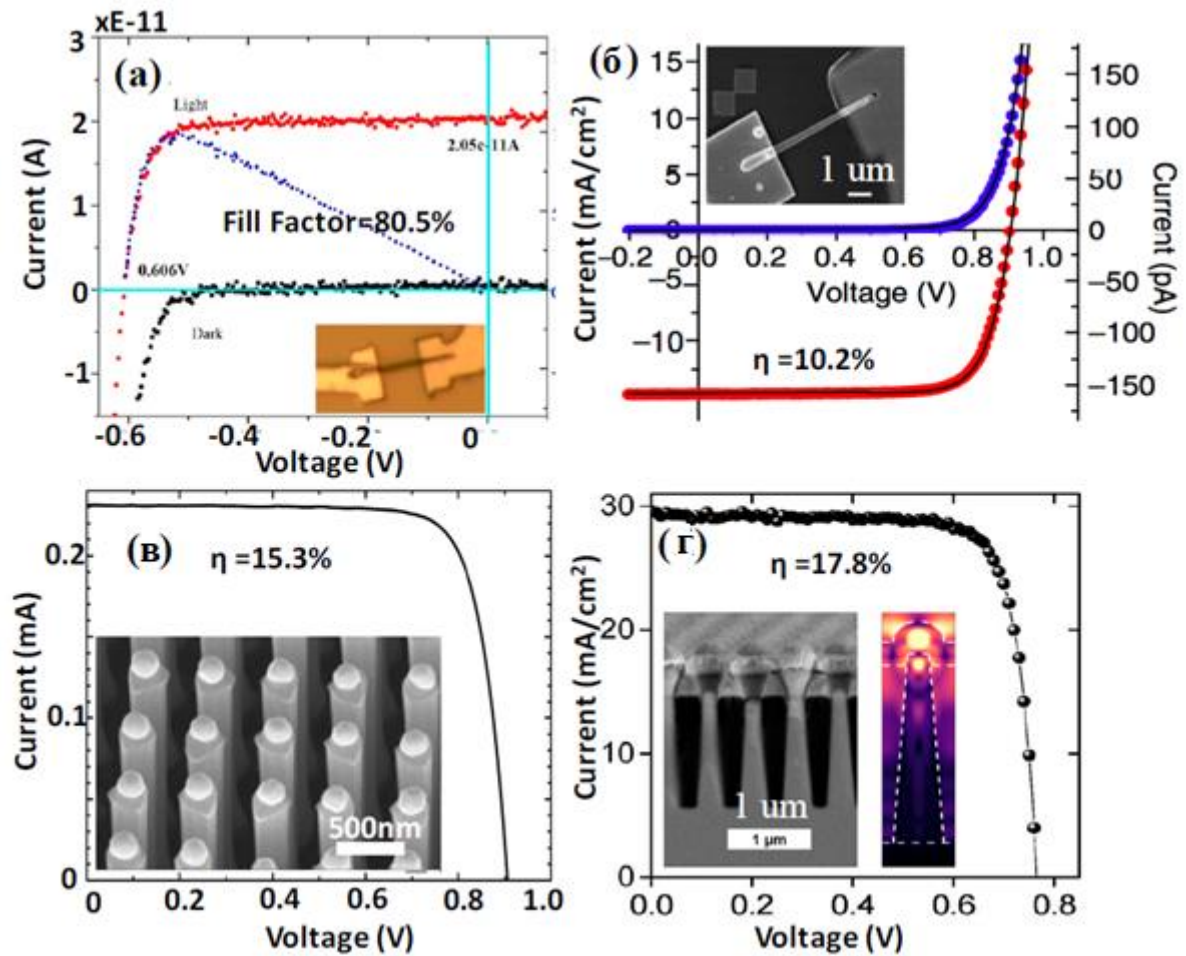


Рис.1.6. Темнові/світлові ВАХ сонячних елементів у вигляді нанодоту GaAs (а) та GaAsP (б) або нанодотових систем GaAs (в) та InP (г), виміряні при сонячному освітленні (AM1,5G) [1]

Поряд з цим подібні дані для фотоелектричних перетворювачів можуть бути перевірені або змодельовані за допомогою програмних симуляторів Silvaco TCAD [11], Comsol Multiphysic [12], тощо. Результати моделювання коаксіальних р-і-n-структур нанодотових сонячних елементів на основі Si [10-11], GaAs [11] та ін. дозволяють краще зрозуміти фізичні процеси, що відбуваються у таких зразках.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методи отримання кремнієвих структур

Виробництво монокристалів кремнію в основному здійснюють методом Чохральського (до 80-90% споживаного електронною промисловістю) і меншою мірою методом безтигельної зонної плавки.

Ідея методу отримання кристалів по Чохральському полягає у зростанні монокристалу за рахунок переходу атомів з рідкої або газоподібної фази речовини у тверду фазу на їхньому межі розділу. Щодо кремнію цей процес може бути охарактеризований як однокомпонентна ростова система рідина – тверде тіло.

Після легування та механічної обробки кремній є пластиною діаметром 15 - 40 см, товщиною 0,5 - 0,65 мм з однією дзеркальною поверхнею.

Основна частина монокристалів кремнію, які отримують методом Чохральського, використовується для виробництва інтегральних мікросхем; незначна частина (близько 2%) йде виготовлення сонячних елементів. Метод є оптимальним виготовлення приладів, які потребують високих значень питомого опору (до 25 Ом·см) через забруднення киснем та інші домішками з матеріалу тигля.

Вирощування кристалів кремнію методом безтигельної зонної плавки (БЗП) здійснюють на основі одновиткового індуктора (типу «голкового вушка»), внутрішній діаметр якого менший за діаметр вихідного полікристалічного стрижня і кристала. У всіх сучасних системах зонної плавки використовується стаціонарне положення індуктора, а полікристалічний стрижень і монокристал, що росте, переміщуються. Швидкість вирощування кристалів методом БЗП вдвічі більша, ніж методом Чохральського, завдяки вищим градієнтам температури. Через технічні труднощі вирощувані методом БЗП кристали кремнію (їхній діаметр

доведений до 150 мм) поступаються діаметром кристалам, одержуваним методом Чохральського (табл.1.1).

При безтигельній зонній плавці легування кристала, що вирощується, як правило, проводять з газової фази шляхом введення в газ-носії (аргон) газоподібних сполук легуючих домішок. При цьому питомий опір кристалів може змінюватися в широких межах, досягаючи 200 Ом·см. При вирощуванні у вакуумі отримують монокристали з дуже високим опором - до $3 \cdot 10^4$ Ом·см. Для отримання такого матеріалу, щоб уникнути забруднень, не застосовують різання або обдирання стрижня полікристалічного кремнію. Залишкові донори, кисень, вуглець і важкі метали видаляють із кремнієвого стрижня п'ятикратним зонним очищенням у вакуумі. До недоліків методу БЗП відноситься значна радіальна неоднорідність розподілу питомого опору (20-30%) кристалів, які можна зменшити використанням трансмутаційного легування.

Таблиця 1.1

Порівняльні характеристики монокристалів кремнію одержуваних методом Чохральського та БЗП [9]

Параметр	Метод Чохральського	Метод зонної плавки
Максимальний діаметр пластини, мм	150- 400	200
Питомий опір р-тип, Ом·см	0,005-50	0,1-3000
Питомий опір п-тип, Ом·см	0,005-50	0,1-800
Орієнтація	[111], [110], [100]	[111], [100]
Час життя неосновних носіїв, мкс	10-50	100-3000
Вміст кисню, атом/см ²	10-100	<10
Вміст вуглецю, атом/см ²	10	<10

В даний час аморфні плівки a-Si:H в основному отримують розкладанням силану в плазмі розряду, що тліє. Підкладки, на які необхідно нанести плівки a-Si:H, розміщують у робочій камері і пропускають через неї зі швидкістю від 0,1 до 30 см³/хв суміш газоподібного силану з воднем, збуджуючи та підтримуючи за допомогою електромагнітного поля тліючий газовий розряд. Розкладання молекул силану на атоми водню і кремнію, що беруть в облогу на підкладки, відбувається в плазмі тліючого розряду. Легують плівки a-Si:H у процесі їх зростання атомами фосфору або бору (відповідно донорна та акцепторна домішки), для чого додають до силану газоподібні фосфін PH₃ або диборан B₂H₆. Молекули цих газів, як і молекули силану, розкладаються в плазмі тліючого розряду, внаслідок чого їхні атоми потрапляють у плівку, що росте a-Si:H.

Плівки a-Si:H, одержувані розкладанням силану, мають високі фотоелектричні властивості, що забезпечує їх успішне застосування в сонячних батареях. Однак необхідні для їх нанесення газоподібні компоненти мають підвищену небезпеку. Так, силан вибухо- та пожежонебезпечний газ, що самозаймається при контакті з повітрям, а фосфін та диборан – гази високої токсичності.

Поширеним методом одержання плівок a-Si:H є високочастотне іонно-плазмове розпилення кремнію в атмосфері аргонно-водневої плазми.

У робочій камері установки розташовані електроди для створення та підтримки плазми тліючого розряду, тримачі мішені матеріалу, що розпорошується, і підкладок. Для отримання a-Si:H встановлюють на тримач мішень із кристалічного кремнію, відкачують робочу камеру, а потім заповнюють її сумішшю аргону та водню до тиску 1,3 – 0,1 Па. При подачі напруги на електроди з-поміж них виникає тліючий розряд, газ іонізується та її іони під впливом електричного поля бомбардують мішень. Остання розпорошується та її частки осаджуються як плівки аморфного кремнію на підкладках. Присутній у робочій камері водень захоплюється частинками, що розпиляються, і потрапляє в зростаючу плівку, причому його вміст у плівці

можна регулювати від нуля до декількох відсотків, змінюючи співвідношення газів в газовій суміші і режими розпилення.

Легують плівки Si:H трьома способами: введенням у газову суміш фос-фіну або диборану (що небажано через їх високу токсичність); одночасним розпиленням кремнію та легуючого матеріалу; розпиленням кремнієвої мішені, легованої у заданій кількості потрібною домішкою.

Фотоелектричні властивості плівки Si:H , одержуваних високочастотним іонно-плазмовим розпиленням, дещо гірше, ніж плівок, що наносяться розкладанням силану, що зумовлено більшою концентрацією локалізованих станів у забороненій зоні. Водночас метод іонно-плазмового розпилення вигідно відрізняється від методу розкладання силану з погляду безпеки.

2.2. Чисельне моделювання нанодротових сонячних елементів

Розглянемо елементи методики покладеної в основу чисельного моделювання нанодротових сонячних елементів. Аксиальні p-i-n структури нанодротових сонячних елементів були спроектовані та досліджені за допомогою інструментів Silvaco TCAD [16-18], Серед особливостей програмного коду [19] слід відміти, що в Atlas3D загальна циліндрична структура створювалася за допомогою оператора `mesh cylindrical three.d`, де параметр `cylindrical` дозволяв задавати радіус, кут та Z-координати, а параметр `three.d` інформував симулятор про створення 3D-сітки. По ходу виконання програмного коду симулятор готував звіт у вигляді чисельних даних про електричні параметри спроектованих структур, виводив темнові та світлові (освітлення AM1.5G, 1 sun illumination) вольт-амперні характеристики та 3D геометрію.

Враховуючи розмірність досліджуваних структур, концентраційні розподіли домішок та температурну залежність фізичні особливості транспорту заряду враховувались за допомогою оператора `models fermi`

ni.fermi cvt srh temperature, Параметр fermi дозволив враховувати транспорт заряду, який визначався згідно дрейфово-дифузійної моделі зі статистикою Фермі-Дірака, Параметр srh дозволяє враховувати багато фізич-них процесів, включаючи рекомбінаційні механізми Шоклі-Рід-Холла, які є домінуючими в подібних структурах та повинні обов'язково враховуватися при моделюванні їх електричних характеристик.

Приклад програмного коду для розрахунку параметрів ФЕП на основі нанодротів кремнію при температурі 300 К наведено нижче

```

go atlas
mesh cylindrical three.d
r.mesh l=0 spacing=0.05
r.mesh l=0.08 spacing=0.01
r.mesh l=0.16 spacing=0.05
r.mesh l=0.19 spacing=0.01
# задання кутів та ділень кутів
a.m l=0 spac=60
a.m l=360 spac=60
# задання напрямку z
z.mesh l=0 spacing=0.01
z.mesh l=0.03 spacing=0.01
z.mesh l=0.11 spacing=0.025
z.mesh l=3.105 spacing=1
z.mesh l=3.11 spacing=0.0015
region num=1 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0 z.max=0.03 r.min=0
r.max=0.19
region num=2 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.03 z.max=3.105
r.min=0.16 r.max=0.19
region num=3 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.03 z.max=0.11
r.min=0 r.max=0.16

```

region num=4 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.11 z.max=3.105
r.min=0.08 r.max=0.16

region num=5 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.11 z.max=3.11
r.min=0 r.max=0.08

region num=6 material=air a.min=0 a.max=360 z.min=3.105 z.max=3.11
r.min=0.08 r.max=0.29

electrode name=cathode a.min=0 a.max=360 r.min=0 r.max=0.19 z.min=0
z.max=0

electrode name=anode a.min=0 a.max=360 r.min=0 r.max=0.19 z.min=3.11
z.max=3.11

doping region=1 uniform n.type conc=5e+17

doping region=2 uniform n.type conc=5e+17

doping region=3 uniform n.type conc=1e+14

doping region=4 uniform n.type conc=1e+14

doping region=5 uniform p.type conc=4e+16

save outf=solarex14_0.str

beam num=1 z.origin=-2.0 raytrace=solarex14_1.str \

x.origin=0 y.origin=0 phi=0.0 theta=90 nx=10 nz=10 power.file=solarex14.spec

models fermi ni.fermi cvt srh temperature=300

method BICGST

solve init

log outf=solarex14_0.log

solve previous

solve vstep=0.02 vfinal=0.55 name=anode

log off

solve init

solve b1=1

log outf=solarex14_1.log

solve previous

solve vstep=0.02 vfinal=0.55 name=anode

```

tonyplot -overlay solarex14_0.log solarex14_1.log -set solarex14_0.set
tonyplot3d solarex14_1.str -set solarex14_1.set
extract init inf="solarex14_1.log"
extract name="Jsc" y.val from curve(v."anode", i."cathode") where x.val=0.0
extract name="Voc" x.val from curve(v."anode", i."cathode") where y.val=0.0
extract name="Pm" max(curve(v."anode", (v."anode" * i."cathode")))
extract name="Vm" x.val from curve(v."anode", (v."anode"*i."cathode") ) \
where y.val="$Pm"
extract name="Im" "$Pm"/"$Vm"
extract name="FF" ("Pm"/("$Jsc"*$Voc))
extract name="Eff" ("Pm"/(3.14157*(0.19)*(0.19)*1e-8*0.1))*100

```

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Транспортні моделі

Як відомо базовими для Atlas (симулятора Silvaco TCAD) [13] є рівняння Пуассона, рівняння безперервності та транспортні рівняння.

Електростатичний потенціал пов'язаний з просторовою густиною заряду, як зазначено в рівнянні Пуассона [13]:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \nabla \psi) = -\rho, \quad (3.1)$$

де ψ , ε та ρ - електростатичний потенціал, діелектрична проникненість та локальна густина просторового заряду

Наступне рівняння встановлює зв'язок між напруженістю електричного поля електричним потенціалом (жирним шрифтом позначені векторні величини):

$$\mathbf{E} = -\nabla \psi. \quad (3.2)$$

Рівняння неперервності визначають швидкості зміни концентрацій носіїв заряду:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_n + G_n - R_n, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_p + G_p - R_p, \quad (3.4)$$

де \mathbf{J}_n та \mathbf{J}_p , G_n та G_p , R_n та R_p , q - щільність струму електронів і дірок, швидкість генерації електронів і дірок, швидкість рекомбінації для електронів і дірок, елементарний заряд.

Рівняння для визначення величин J_n , J_p , G_n , G_p , R_n і R_p різні в залежності від транспортної моделі, яка використовується. Найпростішою в Atlas є базова дрейф-дифузійна транспортна модель. Недоліком її використання є менша точність для об'єктів малих розмірів. Рівняння базової дрейф-дифузійної транспортної моделі:

$$J_n = qn\mu_n E_n + qD_n \nabla n, \quad (3.5)$$

$$J_p = qn\mu_p E_p - qD_p \nabla p, \quad (3.6)$$

де μ_n та μ_p , D_n та D_p - рухомості носіїв для електронів і дірок, коефіцієнти дифузії для електронів і дірок

Подальше рішення задачі пов'язують із визначенням коефіцієнтів дифузії. Для цього використовують відомі статистики Больцмана та Фермі-Дірака. Слід відмітити, що остання більш придатна, коли моделюються області з високим легуванням та об'єкти малих розмірів.

Рівняння Ейнштейна для коефіцієнтів дифузії в рамках статистики Больцмана:

$$D = \frac{kT_L}{q} \mu, \quad (3.7)$$

де k , T_L – постійна Больцмана та температура решітки

Рівняння для коефіцієнтів дифузії в рамках статистики Фермі-Дірака для електронів (подібні вирази використовуються для дірок):

$$D = \frac{\left(\frac{kT_L}{q} \mu_n\right) F_{1/2}\left\{\frac{1}{kT_L}[\varepsilon_{Fn} - \varepsilon_c]\right\}}{F_{-1/2}\left\{\frac{1}{kT_L}[\varepsilon_{Fn} - \varepsilon_c]\right\}} \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_{F_n} = -q\phi_n = \psi - \frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{ie}}\right), \quad (3.9)$$

де F_α , ε_c , ε_{Fn} , ϕ_n та n_{ie} - інтеграл Фермі-Дірака порядку α , енергія зони провідності, заданий квазі-рівень Фермі, квазіпотенціал Фермі та ефективна власна концентрація носіїв.

Недоліком використання базової дрейф-дифузійної моделі є те, що вона не враховує квантових ефектів, таких як хвильова природа носіїв заряду. У нанодротовому сонячному елементі носії обмежені в одному напрямку. Це впливає на радіальну густину зарядів, а також на густину станів. Квантові ефекти можуть бути змодельовані в рамках моделі Self-Consistent Coupled Schrodinger Poisson Model, але вона не може самостійно вирішити транспортні проблеми. Тому останню використовують у поєднанні з моделлю Drift-Diffusion Mode-Space Method, or the Mode Space Non-Equilibrium Green's Function Approach. Відмітимо, що для моделювання нанодротових пристроїв в Atlas розв'язується рівняння Шредінгера в циліндричних координатах, вигляд якого для електронів та дірок можна знайти в [13].

Поряд з цим актуальним напрямком досліджень є вивчення температурних залежностей параметрів сонячних елементів [14-16]. Так у роботі [15] обговорюється фізика процесів, які визначають температурну чутливість фотоелектричних перетворювачів, наведено методику визначення температурних коефіцієнтів електричних параметрів (напруга холостого ходу U_{oc} , густина струму короткого замикання J_{sc} , форм фактор FF , ефективність η) нанодротових сонячних елементів.

Авторами [16] досліджено вплив температури на величини U_{oc} , J_{sc} , FF , η для нанодротових сонячних елементів на основі Si. Отримано типовий характер температурних залежностей, але відмічено зменшення величини J_{sc} при зростанні температури, що можливо пов'язано зі збільшенням впливу поверхневої рекомбінації носіїв заряду

3.2. Геометрія аксіальної p-i-n структури

Результати числового моделювання аксіальних p-i-n структур нанодротових сонячних елементів на основі Si представлені в даній частині роботи. Розташований між стандартними електродами фотогальванічний елемент мав загальну довжину 3,11 мкм та діаметр 380 нм. Він складався із позитивно зарядженого центрального (p-область), нейтрально зарядженого внутрішнього (i-область) та негативно зарядженого зовнішнього (n-область) шарів. Коли фотон потрапляє в нанодріт, він генерує електрон-діркову пару в i-області. Електрони радіально переміщуються від центру до збідненого шару контакту зовнішньої n-оболонки, а дірки рухаються до до збідненого шару p-області всередину. Перевага кругового перерізу полягає в тому, що електрони і дірки повинні рухатися на значно меншу відстань, ніж у плоскій комірці, щоб дістатися до контактів, що їх збирають.

Для розрахунку електричних характеристик аксіальних фотогальванічних елементів на основі нанодротів Si було обрано однакові геометричні структури (рис.3.1) із наступними параметрами: для p-області довжина 3,00 мкм та діаметр 160 нм; для i-шару довжина 2,95 мкм та товщина 80 нм; для n-шару довжина 3,10 мкм та товщина 30 нм. Повітряний прошарок, який слугував ізолятором для i-n-областей відносно анода, мав товщину 5 нм. Приконтатний шар біля електрода катоду мав товщину 3 нм та легований донорною домішкою з концентрацією $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Матеріал електродів був вибраний за замовчуванням, а їх товщина мінімальною. Між останнім та i-областю знаходилась розділовий прошарок з товщиною 8 нм та легований донорною домішкою з концентрацією $1 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$. При проєктуванні структур було використано наступну конфігурацію профілів легування базових шарів: в об'ємі ядра концентрація акцепторної домішки становила $4 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$; проміжна була легована донорною домішкою з концентрацією $1 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$; зовнішній шар мав більш високу концентрацію донорної домішки рівну $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

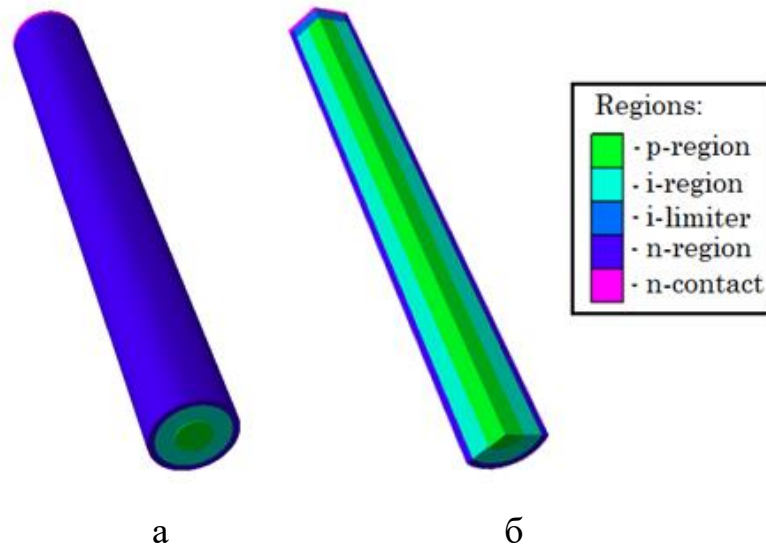


Рис. 3.1. Геометрія аксіальної р-і-п структури нанодровового сонячного елемента (а) та відповідний зріз з відображенням окремих областей (б) [23]

Як приклад на рис.3.2 приведено типові змодельовані темнові та світлові вольт-амперні характеристики для аксіальних р-і-п-структур нанодровових сонячних елементів на базі Si при різних температурах.

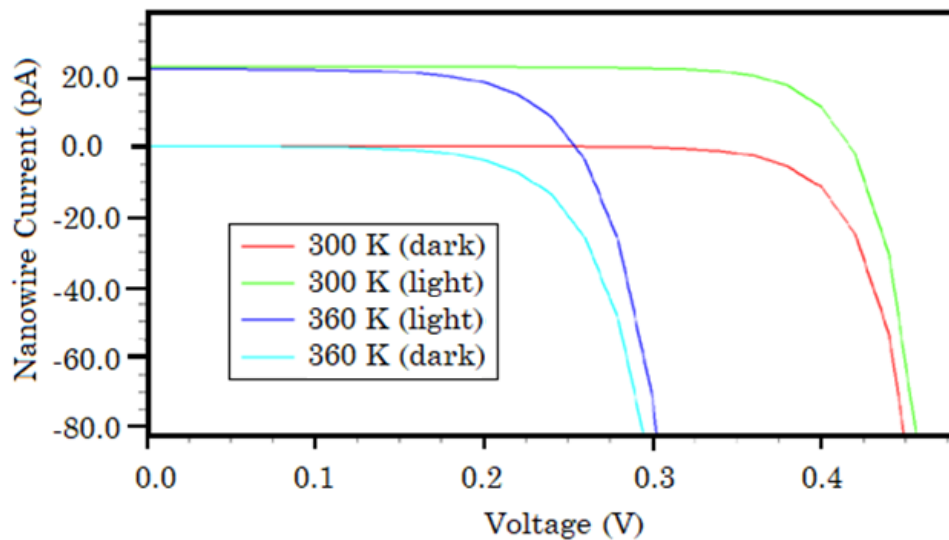


Рис.3.2. Темнові (dark) та світлові (light) вольт-амперні характеристики нанодровових СЕ на основі Si для температур 300 К та 360 К [23]. Використано позначення величини сили струму $1 \text{ pA} = 1 \times 10^{-12} \text{ A}$

Аналіз таких температурних залежностей отриманих для р-і-п структур нанодотових сонячних елементів на основі Si покладений в основу подальшого обговорення отриманих результатів,

3.2. Температурні залежності

Типові вольт-амперні характеристики при температурах 280 К, 300 К, 340 К, 360 К, 380 К та 400 К для запропонованих структур р-і-п-типу приведені відповідно на рис. 3.3.

При зростанні температури фіксується ряд типових змін the current-voltage characteristics NW-SCs, які викликані в основному такими фізичними процесами [15]: зі збільшенням температури в досліджуваному діапазоні температур зменшується рухливість носіїв заряду, що призводить до зменшення величини сили струму

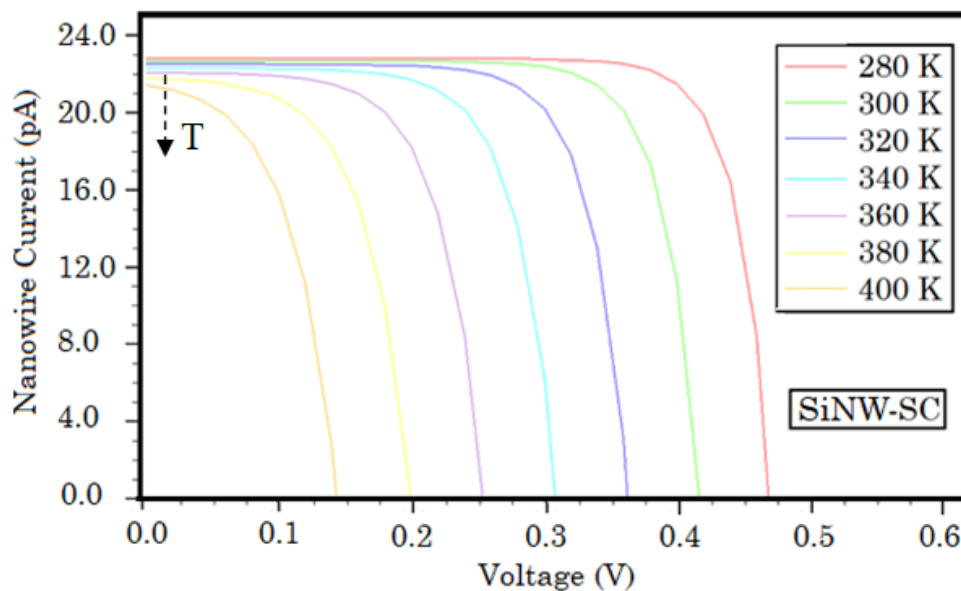


Рис.3.3. Світлові вольт-амперні характеристики кремнієвих нанодотових сонячних елементів (SiNW-SC) при зміні температури [23]. Стрілкою вказаний напрям зростання температури (T).

Таблиця 3.1

**Температурні залежності параметрів кремнієвого нанодіодного
сонячного елемента [23]**

Параметри	280К	300К	320К	340К	360К	380К	400К
U_{OC}, V	0,47	0,42	0,36	0,31	0,25	0,20	0,14
$J_{SC}, mA/cm^2$	20,11	20,02	19,93	19,67	19,49	19,23	18,96
U_m, V	0,40	0,34	0,30	0,24	0,20	0,14	0,08
I_m, pA	21,50	21,40	20,20	20,00	18,25	18,27	15,80
P_m, pW	8,60	7,30	6,10	4,80	3,60	2,60	1,30
$FF, \%$	80,38	77,09	74,07	70,30	65,08	58,67	51,21
$\eta, \%$	7,59	6,44	5,35	4,27	3,21	2,26	1,39

Виходячи з світлової ВАХ так кривої навантаження визначаються такі параметри фотоелектричних приладів як: U_{OC} — напруга ХХ; I_{SC} — струм короткого замикання (КЗ); FF — фактор заповнення ВАХ; η — ККД.

Відповідний характер температурних залежностей обумовлений зменшенням величини внаслідок відповідного зменшення рухливості носіїв заряду та зростанням рекомбінаційних процесів. При зростанні температури в інтервалі від 280 К до 400 К призводить до зменшення густини струму замикання J_{SC} на 22,5 % , спадання сили струму на 10,7 %. Результати моделювання TCAD узгоджуються з відомими експериментальними даними.

На основі температурних залежностей були розраховані відповідні температурні коефіцієнти [22,23] для U_{OC} та J_{SC} :

$$\beta_{U_{co}} = \frac{U_{oc}(T) - U_{oc}(300)}{U_{oc}(300)(T - 300)}$$

та

$$\beta_{J_{sc}} = \frac{J_{sc}(T) - J_{sc}(300)}{J_{sc}(300)(T - 300)}$$

Температурні коефіцієнти для форм фактора та ефективності відповідно мають наступний вигляд:

$$\beta_{FF} = \frac{FF(T) - FF(300)}{FF(300)(T - 300)}$$

та

$$\beta_{\eta} = \frac{\eta(T) - \eta(300)}{\eta(300)(T - 300)}$$

У даному випадку в інтервалі температур від 300 К до 400 К температурні коефіцієнти $\beta_{U_{oc}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} та β_{η} становили відповідно - $6,67 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, - $0,53 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, - $3,36 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ та - $7,84 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Отримані дані про величини температурних коефіцієнтів добре узгоджуються з експериментальними даними для сонячних елементів на основі Si [15,16]. Слід відмітити, що температурні залежностей для величин U_{oc} , FF та η мають типовий характер для сонячних елементів різних типів. Однак спостерігається певне зменшення J_{sc} із зростанням температури, що також фіксувалось в роботі [16] та можливо пов'язано із збільшенням впливу поверхневої рекомбінації для нанодротів.

Максимальні значення сили катодного струму, анодної напруги та потужності в інтервали робочих температур від 280 К до 340 К відповідно зменшувалися на 7,50 %, 66,67% та 79,17 %. Такі дані також добре корелюють із даними [15,16].

ВИСНОВКИ

Досліджено вплив температур в інтервалі від 280 К до 400 К на вольт-амперні характеристики та електричні параметри коаксіальних р-і-п структур нанодротових сонячних елементів на основі Si. Запропоновано вирази для оцінки температурних коефіцієнтів $\beta_{U_{oc}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} , β_{η} , а отримані їх величини показали добре узгодження з експериментальними даними. Типові температурні залежності можуть бути пояснені згідно відповідної теорії [15].

Спроектвані 3D структури в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі з статискою Фермі-Дірака демонструють допустимі величини електричних параметрів: напруга холостого ходу U_{oc} , густина сили струму короткого замикання J_{sc} , максимальна потужність P_m , форм фактор FF та фотовольтаїчна ефективність η . З цієї причини отримані результати можуть бути застосовані для подальшого дослідження нанодротових сонячних елементів.

В інтервалі температур від 300 К до 400 К температурні коефіцієнти $\beta_{U_{oc}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} та β_{η} становили відповідно $-6,67 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, $-0,53 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$, $-3,36 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ та $-7,84 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Отримані дані про величини температурних коефіцієнтів добре узгоджуються з експериментальними даними для сонячних елементів на основі Si.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Nanowires for high-efficiency, low-cost solar photovoltaics / Y. Zhang, H. Liu // *Crystals*. – V. 9, 87. – 2019.– P. 1-25.
2. Integration of silicon nanowires in solar cell structure for efficiency enhancement: A review / M. K. Sahoo, P.Kale // *J. Materiomics*. – V. 5, 1. – 2019. – P. 34-48.
3. Axial vs radial junction nanowire solar cell / V. Raj, H.H.Tan, C.Jagadich // *Asian J. Phys.* – V. 28, No 7-9, – 2019. – P.719-747.
4. Calculation of Hole Concentrations in Zn Doped GaAs Nanowires / J. Johansson, M. Ghasemi, S. Sivakumar et al. // *Nanomaterials*. – V.10, 2524. – 2020. – P. 1-12
5. Single-nanowire, low-bandgap hot carrier solar cells with tunable open-circuit voltage / S. Limpert, A. Burke, I-Ju Chen et al. // *Nanotechnology*. – V. 28, (43). – 2017. – P. 434001.
6. Towards nanowire tandem junction solar cells on silicon / M. Borgstrom, M. H. Magnusson, F. Dimroth et al. // *IEEE Journal of Photovoltaics*. – V. 8(3). – 2018. – P. 733-740.
7. Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources / B. Tian, X. Zheng, T. J. Kempa et al. // *Nature*. – V. 449. – 2007. – P. 885–889.
8. Coaxial multishell nanowires with high-quality electronic interfaces and tunable optical cavities for ultrathin photovoltaics / T.J. Kempa, J. F. Cahoon, S.-K. Kim et al. // *PNAS*. – V. 109, No 5. – 2012. – P. 1407.
9. Understanding InP nanowire array solar cell performance by nanoprobe-enabled single nanowire measurements / G. Otnes, E. Barrigón, C. Sundvall et al. // *Nano Lett.* – V. 18 No 5. – 2018. – P. 3038-3046.
10. Topical review: pathways toward cost-effective single-junction III–V solar cells / Vidur Raj et al // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – V. 55. – 2022. –P. 143002.

11. Modeling and simulation of nanorods photovoltaic solar cells: A review / N.M. Ali, N.H. Rafat // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. – V. 68. – 2017. – P. 212–220.
12. Numerical modeling and simulation for a radial p-i-n nanowire photovoltaic device / S. Abdellatif, K. Kirah // *Energy Procedia*. – V. 36. – 2013. – P. 488-491.
13. Silvaco, ATLAS user's manual device simulation software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 1776 p.
14. Operating temperature effect on the thin film solar cell efficiency/ R.V. Zaitsev, M.V. Kirichenko, G.S. Khrypunov et al. // *J. Nano- Electron. Phys.* – 2019. – V. 11, No 4. – P. 04029-6.
15. Physics of the temperature coefficients of solar cells / O. Dupré, R. Vaillonet, M.A. Green // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*. – V. 140. – 2015. – P. 92.
16. Influence of Si nanowires on solar cell properties: effect of the temperature / O.V. Pylypova, A.A. Evtukh, P.V. Parfenyuk et al. // *Appl. Phys. A*. – V. 124. – 2018. – P. 773.
17. Silvaco, DeckBuild User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018. – 241 p.
18. Silvaco, ATHENA User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 444 p.
19. <https://silvaco.com/examples/tcad> – Silvaco, TCAD Exaples, дата доступу: 24.05.2022 р.
20. Приладово-технологічне моделювання Silvaco TCAD при викладанні навчальних дисциплін інженерно-технічного циклу / [І.П. Бурик, А.О. Головня, М.М. Іващенко] // *Матеріали X Науково-методичної конференції, м.Суми, 14-15 травня 2020 р.* – Суми: СумДУ, 2020. – С. 39-41.
21. Numerical simulation of FinFET transistors parameters/ I.P Buryk, A.O. Golovnia, M.M. Ivashchenko, L.V.Odnodvoretz // *J. Nano- and electronic Physics*. – V.12, №3. – 2020. – P. 03005-4.

22. Structure and electrophysical properties of double-component film alloys based on molybdenum and iron or nickel / I.P. Buryk, T.M. Hrychanovs'ka, D.V. Poduremne et al.// J. Nano- Electron. Phys. – 2018. – V. 10, No 5. – P. 05026-05026-4.
23. Simulation of parameters of coaxial solar cells based on Si and InP nanowires/ I.P. Buryk, L.V. Odnodvoretz, Ya.V. Khyzhnya // J. Nano- Electron. Phys. – 2021. – V. 13, No 1. – P. 01012-4.
24. Василюк Х. В. Вдосконалення нормативно-технічної бази випробувань сонячних перетворювачів: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.01.02 / Національний університет «Львівська політехніка». – Львів, 2017. – 20 с.
25. Рябко А. Використання сонячних модулів у лабораторному практикумі з фізики /А. Рябко, Р. Кухарчук // Педагогічні науки: теорія, історія, інноваційні технології. – 2018, № 1 (75) . – С. 65-75.
26. Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Числове моделювання робочих характеристик сонячних елементів з використанням програмного пакету SCAPS-3302» з дисципліни "Фізико-технологічні основи перетворення сонячної енергії" / О.М. Кобяков, Ю.С. Єрмоменко, М.М. Іващенко, А.С. Опанасюк - Суми: СумДУ, 2015. - 28 с.
27. Божко К.М. Вдосконалення методів та засобів контролю дефектів фотоелектричних сонячних батарей: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.11.13 / Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут». – Київ, 2016. – 24 с.
28. Zavorotnyi V.F. The laboratory tester of solar cells with dynamic reconfiguration of measuring system / V. F. Zavorotnyi, O.V. Borisov // Microsyst Electron Acoust. – 2018. – V. 23, №. 1. – P. 23-29.

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ КРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КОНОТОПСЬКИЙ ІНСТИТУТ

Кафедра електронних
приладів і автоматики

Кваліфікаційна робота бакалавра

**ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ТЕМПЕРАТУРИ
НА ПАРАМЕТРИ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА
ОСНОВІ КРЕМНІЄВИХ НАНОДРОТІВ**

Студентка гр. ЕІ.-81.

С.М. Фаткулліна

Науковий керівник,
к. ф.-м. н., доцент

І.П. Бурик

Конотоп 2022

ВСТУП

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі кремнієвих нанодротів.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних моделей сонячних елементів на основі кремнієвих нанодротів, алгоритмів їх комп'ютерного моделювання, аналізу отриманих експериментальних результатів.

При виконанні роботи для розробки та створення структур сонячних елементів на основі кремнієвих нанодротів використовувалися методи комп'ютерного прикладно-технологічного моделювання у програмному середовищі Silvaco TCAD.

У результаті проведених досліджень було виконано ряд моделювань структур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто навичок роботи з транспортними моделями, зроблено висновки про особливості застосування таких елементів в сучасній мікроелектроніці.

Робота складається із вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, особливостей будови кремнієвих фотогальванічних елементів. У другому розділі описано методи отримання кремнієвих структур, розробку та опис програми для моделі фотоелектричного перетворювача сонячної енергії на основі кремнієвих нанодротів. У третьому розділі аргументовано вибір транспортних моделей для р-і-п наноструктур, проаналізовано та порівняно результати моделювання з реальними характеристиками.

РОЗДІЛ 1. ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ПРИНЦИПУ ДІЇ ТА БУДОВА КРЕМНІЄВИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. Фотоелементи з p-i-n структурою

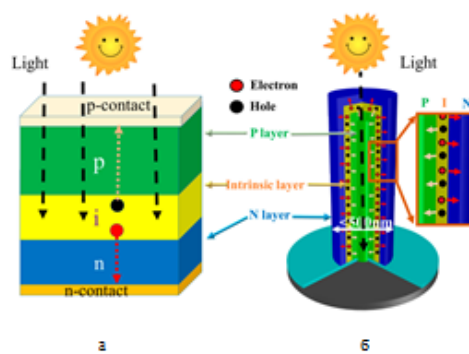


Рис.1.1. Ілюстрація шляху поширення фотона та носіїв у тонкоплівкових (а) і нанодотових (б) сонячних елементах

1.2. Нанодіодні сонячні елементи

4

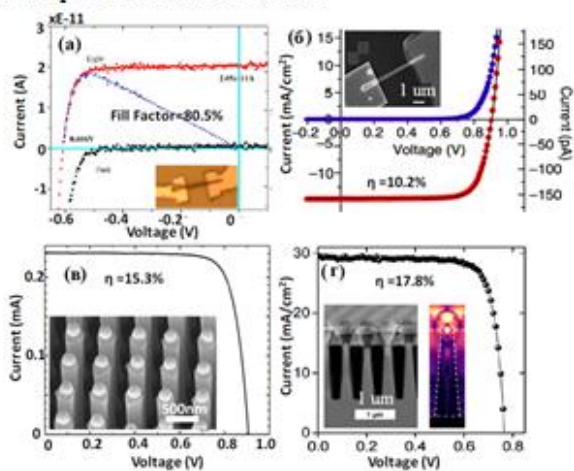


Рис.1.2. Темнові/світлові ВАХ сонячних елементів у вигляді нанодіоду GaAs (а) та GaAsP (б) або нанодіодних систем GaAs (в) та InP (г), виміряні при сонячному освітленні (AM1,5G).

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика моделювання в Silvaco TCAD

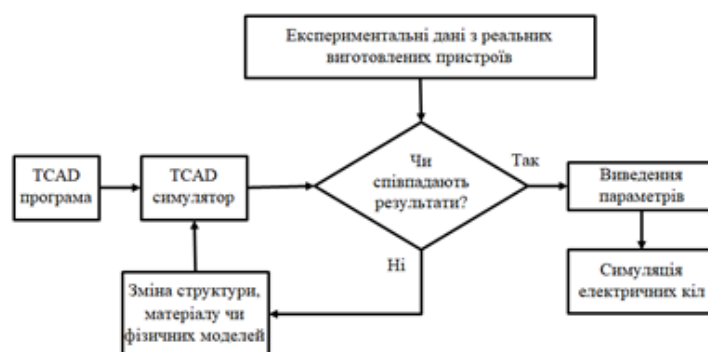


Рис. 2.1. Схема алгоритму проектування в TCAD

2.2. Моделювання геометрії аксіальної р-і-п структури ФЕС

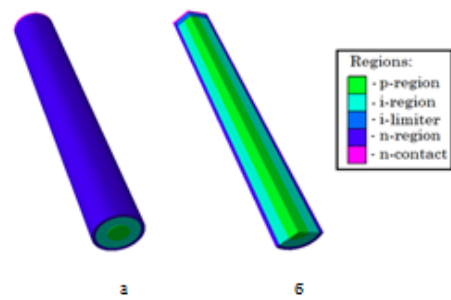


Рис.2.2. Геометрія аксіальної р-і-п структури нанодітного фотоелектричного сонячного елемента на основі Si (а) та відповідний зріз з відображенням окремих областей (б)

РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Температурні залежності ВАХ

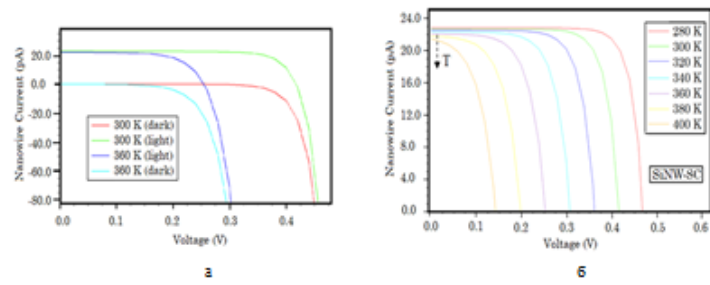


Рис.3.2. Вольт-амперні характеристики нанодотових ФЕС на основі Si:

а - темнові (dark) та світлові (light) для температур 300 К та 360 К;

б - світлові для температур від 280 К до 400 К

3.2. Температурні залежності електричних параметрів

8

Таблиця 3.1
Температурні залежності параметрів
кремнієвого нанодіодового СЕ

Параметр	280К	300К	320К	340К	360К	380К	400К
U_{oc}, V	0,47	0,42	0,36	0,31	0,25	0,20	0,14
$J_{sc}, mA/cm^2$	20,11	20,02	19,93	19,67	19,49	19,23	18,96
U_m, V	0,40	0,34	0,30	0,24	0,20	0,14	0,08
I_m, pA	21,50	21,40	20,20	20,00	18,25	18,27	15,80
P_m, pW	8,60	7,30	6,10	4,80	3,60	2,60	1,30
$FF, \%$	80,38	77,09	74,07	70,30	65,08	58,67	51,21
$\eta, \%$	7,59	6,44	5,35	4,27	3,21	2,26	1,39

Вирази для температурних коефіцієнтів напруги холостого ходу, струму короткого замикання:

$$\beta_{U_{oc}} = \frac{U_{oc}(T) - U_{oc}(300)}{U_{oc}(300)(T - 300)} \quad (3.1)$$

$$\beta_{J_{sc}} = \frac{J_{sc}(T) - J_{sc}(300)}{J_{sc}(300)(T - 300)} \quad (3.2)$$

Вирази для температурних коефіцієнтів форм фактору та фотовольтаїчної ефективності:

$$\beta_{FF} = \frac{FF(T) - FF(300)}{FF(300)(T - 300)} \quad (3.3) \quad \beta_{\eta} = \frac{\eta(T) - \eta(300)}{\eta(300)(T - 300)} \quad (3.4)$$

ВИСНОВКИ

1. Досліджено вплив температур в інтервалі від 280 К до 400 К на вольт-амперні характеристики та електричні параметри коаксіальних p-i-n структур нанодіотових сонячних елементів на основі Si. Розглянуто вирази для оцінки температурних коефіцієнтів напруги холостого ходу, струму короткого замикання, форм фактору та фотовольтаїчної ефективності, а отримані їх величини показали добре узгодження з експериментальними даними.
2. Спроектвані 3D структури в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі з статистикою Фермі-Дірака демонструють допустимі величини електричних параметрів: напруга холостого ходу, густина сили струму короткого замикання, максимальна потужність, форм фактор та фотовольтаїчна ефективність. З цієї причини отримані результати можуть бути застосовані для подальшого дослідження нанодіотових сонячних елементів.
3. В інтервалі температур від 300 К до 400 К температурні коефіцієнти напруги холостого ходу, струму короткого замикання, форм фактору та фотовольтаїчної ефективності становили відповідно - 6,67 мК⁻¹, - 0,53 мК⁻¹, 3,36 мК⁻¹ та - 7,84 мК⁻¹. Отримані дані про величини температурних коефіцієнтів добре узгоджуються з експериментальними даними для сонячних елементів на основі Si.